



TITLE:

# ライセニンとスフィンゴミエリン の相互作用の分子動力学を用いた 解析

AUTHOR(S):

池ノ内, 順一

---

CITATION:

池ノ内, 順一. ライセニンとスフィンゴミエリンの相互作用の分子動力学を用いた解析. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2013, 2012: 109-109

ISSUE DATE:

2013-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/173956>

RIGHT:

ライセニンとスフィンゴミエリンの相互作用の分子動力学を用いた解析

Molecular Dynamics simulations of interaction between Spingomyelin and Lysenin

工学研究科 合成・生物化学専攻 生体認識化学 池ノ内 順一

**背景と目的**

シマミズ体腔液由来のタンパク質、ライセニン Lysenin は、生体膜を構成する脂質の一つ、スフィンゴミエリン Sphingomyelin に結合する。興味深いことに、ライセニンは、スフィンゴミエリンと同じ極性基(ホスホリルコリン phosphorylcholine)を持つホスファチジルコリン Phosphatidylcholine には、全く結合しない。ライセニンがどのようにしてスフィンゴミエリンを特異的に認識しているのかを解明する目的で、分子動力学的手法による両者の結合様式の解明を試みた。

**検討内容**

Discovery Studio を用いて、ライセニンの立体構造予測を行った。また、既に結晶構造が明らかになっている、別のスフィンゴミエリン結合タンパク質であるイクイナトキシン Equina Toxin II の PDB ファイルを用いて、スフィンゴミエリンとの結合について分子動力学シミュレーションを行った。

またスフィンゴミエリンと同じくホスホリルコリン基を有するリン脂質、ホスファチジルコリンについても、ライセニンおよびイクイナトキシンとのドッキングシミュレーションを行い、これらのタンパク質がホスファチジルコリンに結合しないか否か解析を行った。

**結果**

現在、解析中である。

**発表論文**

現在、準備中である。